UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química

Laboratorio de Química Orgánica II, 2025-2

Profesor: Aldo Arellano Hernández

Reporte de Práctica 8

Condensación de Claisen-Schmidt. Obtención de dibenzalacetona

Autores: Morales Garda Francisco, García Colindres Josué	Claves: 11, 7

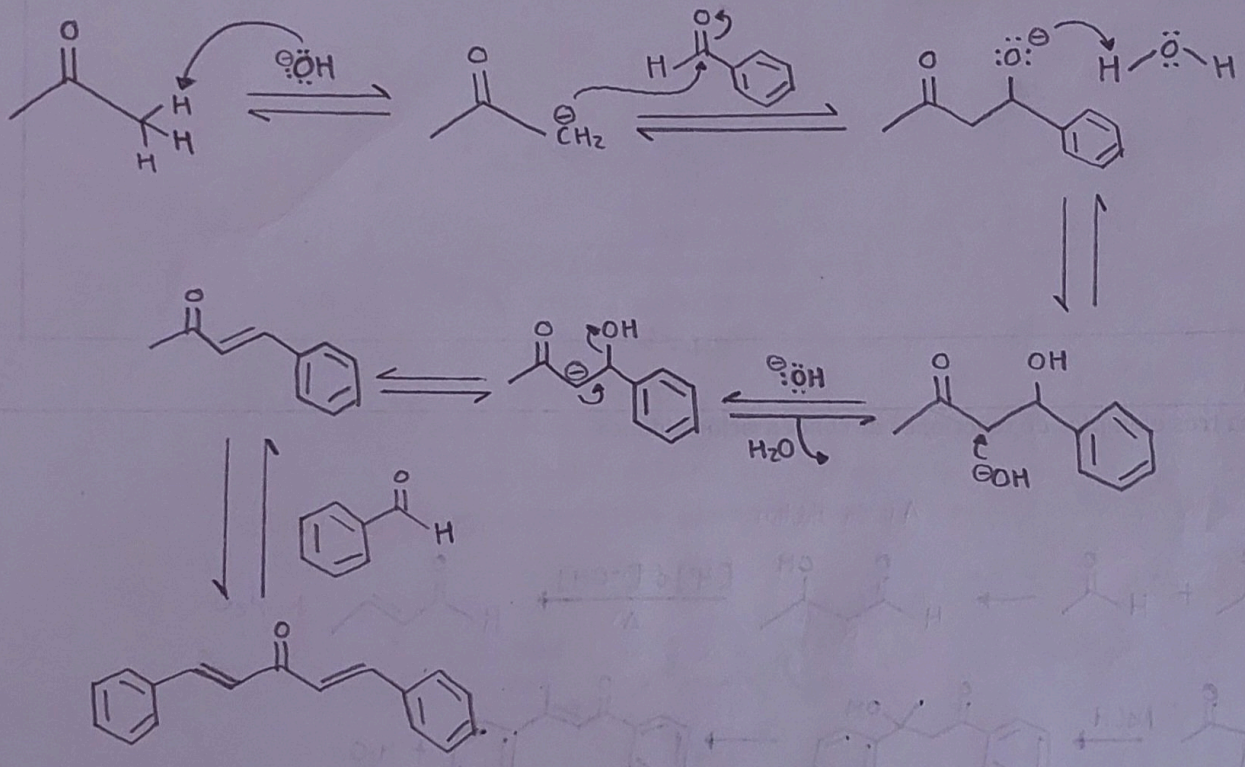
Palabras clave

Condensación aldólica, síntesis de dibenzalacetona, condensación aldólica cruzada y dirigida, condensación del grupo carbonilo.

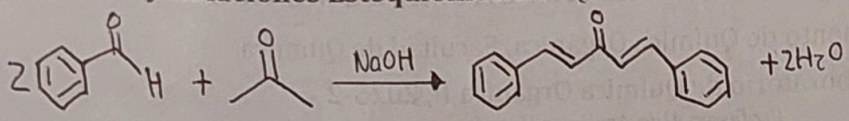
Objetivos

- Conocer las condiciones de reacción que permiten la formación de un producto de condensación aldólica.
- Efectuar una reacción de condensación aldólica cruzada y dirigida cuidando las condiciones de reacción y la adición de los reactivos.
- Ejemplificar una reacción de condensación del grupo carbonilo.

Mecanismo de Reacción



Cálculos y Relaciones Estequiométricas (Calcular mmoles de reactivos utilizados y equivalencias)



$0.5\ mL\ benzaldehído \left(\frac{1.0430\ g}{1\ mL}\right)\left(\frac{1\ mol}{106.12\ g}\right)\left(\frac{10^3\ mmol}{1\ mol}\right) = 4.9142\ mmol\ benzaldehído.$

$0.2\ mL\ acetona \left(\frac{0.791\ g}{1\ mL}\right)\left(\frac{1\ mol}{58.08\ g}\right)\left(\frac{10^3\ mmol}{1\ mol}\right) = 2.7238\ mmol\ acetona$

$4.9142\ mmol\ benzaldehído \left(\frac{1\ mmol\ dibenzalacetona}{2\ mmol\ benzaldehído}\right) = 2.4571\ mmol\ dibenzalacetona.$

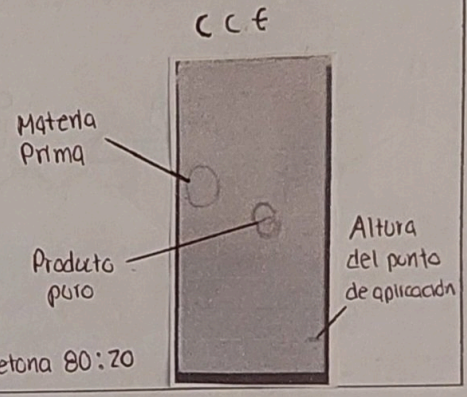
Resultados (Rendimiento, ccf, p.f., etc)

$m_{producto} = 0.4067\ g$

$2.4571\ mmol\ dibenzalacetona \left(\frac{1\ mol}{10^3\ mmol}\right)\left(\frac{234.29\ g}{1\ mol}\right) = 0.5757\ g\ dibenzalacetona.$

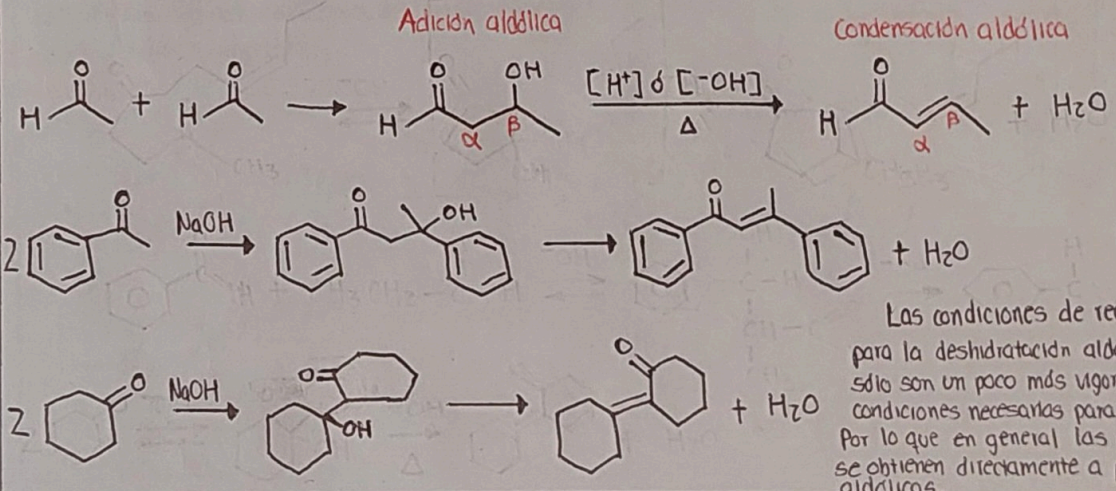
$Rendimiento = 0.4067\ g \left(\frac{100\%}{0.5757\ g}\right) = 70.64\%$

Debido a la falta de tiempo, no se determinó el punto de fusión del producto puro.



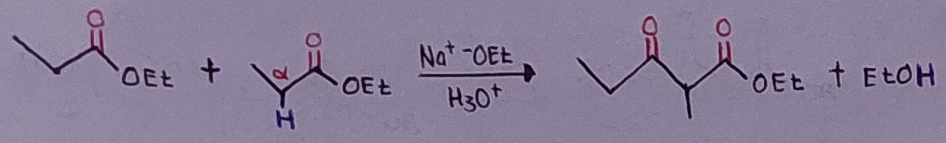
Discusión

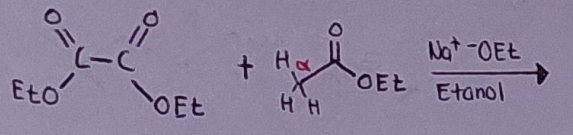
1. Escriba tres ejemplos de reacciones de condensación aldólica.



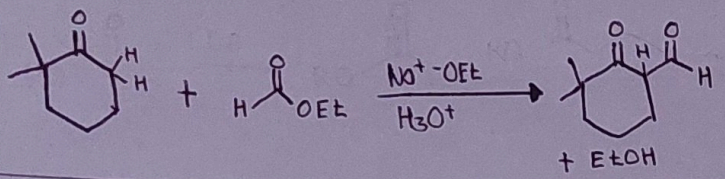
Las condiciones de reacción necesarias para la deshidratación aldólica con frecuencia sólo son un poco más vigorosas que las condiciones necesarias para formar un aldol. Por lo que en general las enonas conjugadas se obtienen directamente a partir de reacciones aldólicas.

2. Escriba tres ejemplos de reacciones de condensación de Claisen





Las reacciones mixtas de Claisen sólo son exitosas cuando uno de los componentes éster no tiene hidrógenos α y por lo tanto no forma un ion enolato.

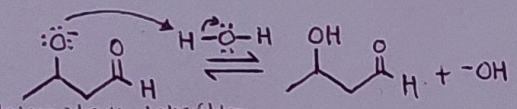


Pueden realizarse reacciones mixtas similares a las de Claisen entre un éster y una cetona. La reacción funciona mejor cuando el componente éster no tiene hidrógenos α y por lo tanto no puede actuar como el donador nucleofílico.

3. Indique las diferencias y/o semejanzas entre una condensación aldólica y una condensación de Claisen.

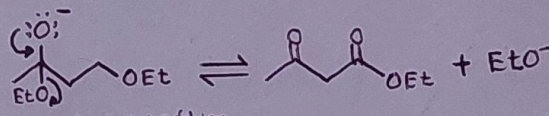
La diferencia entre la condensación aldólica de un aldehído o de una cetona y la condensación de Claisen de un ester involucra el destino del intermediario tetraédrico formado inicialmente: En la reacción aldólica, el intermediario tetraédrico es protonado para dar un producto de alcohol. En la reacción de Claisen, un grupo saliente alcóxido es expulsado del intermediario tetraédrico para generar un producto de sustitución en el grupo acilo.

Condensación aldólica



Intermediario tetraédrico
(Adición del ion enolato al grupo carbonilo)

Condensación de Claisen.



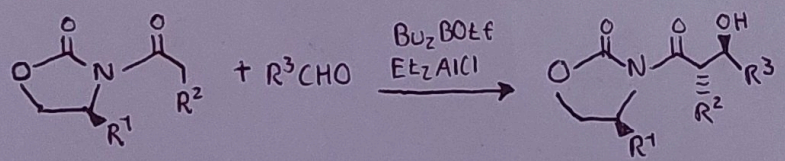
Intermediario tetraédrico.
(Adición del ion enolato a una segunda molécula de éster).

4. Indique en que consiste la condensación aldólica con auxiliar quiral de Evans. Muestre tres ejemplos de su uso.

En condiciones generales catalizadas por ácidos y bases, las reacciones de adición aldólica cruzada presentan problemas de selectividad química, y producen una mezcla de múltiples estereoisómeros. Un método de adición aldólica asimétrica es el desarrollado por Evans, basado en el grupo auxiliar quiral N-aciloxazolona.

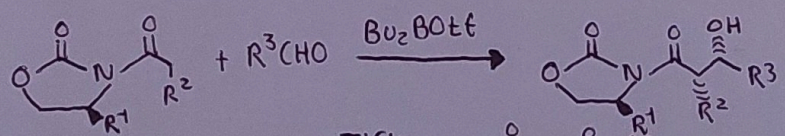
El estereoisómero principal formado por la reacción de adición aldólica de Evans, se denomina producto de Evans-syn. Por otro lado, el uso de un ácido de Lewis grande conduce a la formación del producto anti. Para formar los aldoles no Evans se emplean metales capaces de tener 6 ligandos en su esfera de coordinación como titanio o magnesio.

Ejemplos.

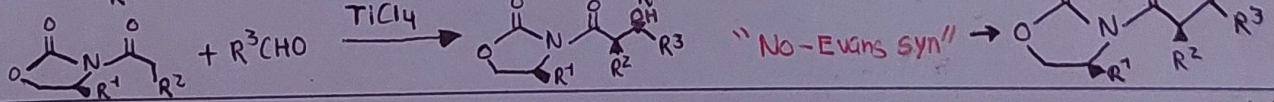


"Evans anti"

Bu_2BOTf: Triflato de dibutilboro



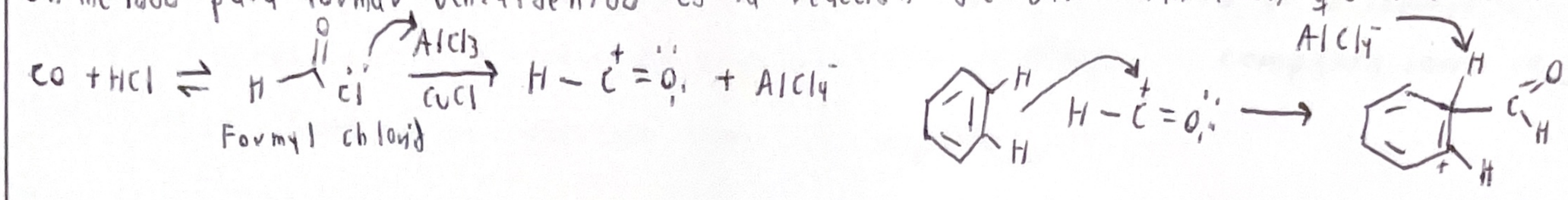
"Evans syn"



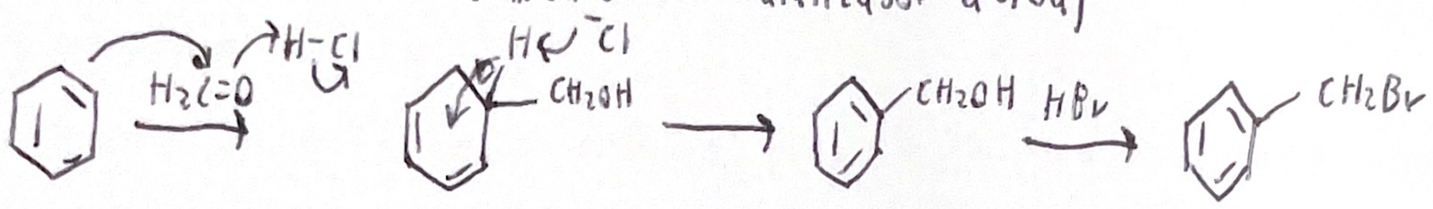
"No-Evans syn" (Mayor acercamiento del producto)

5. **Investigue dos método para sintetizar benzaldehído a partir de benceno.**

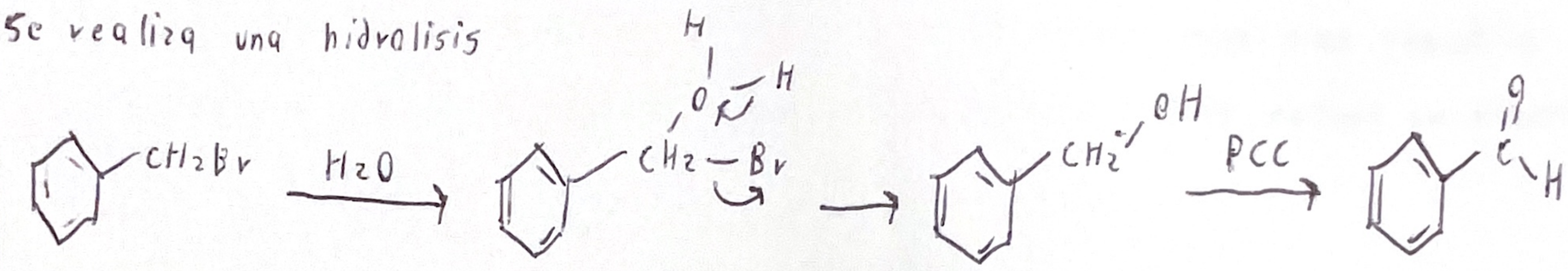
•Un método para formar benzaldehído es la reacción de Gatterman Koch que sucede de la siguiente manera



• Cloración del benceno (con catalizador ácida)

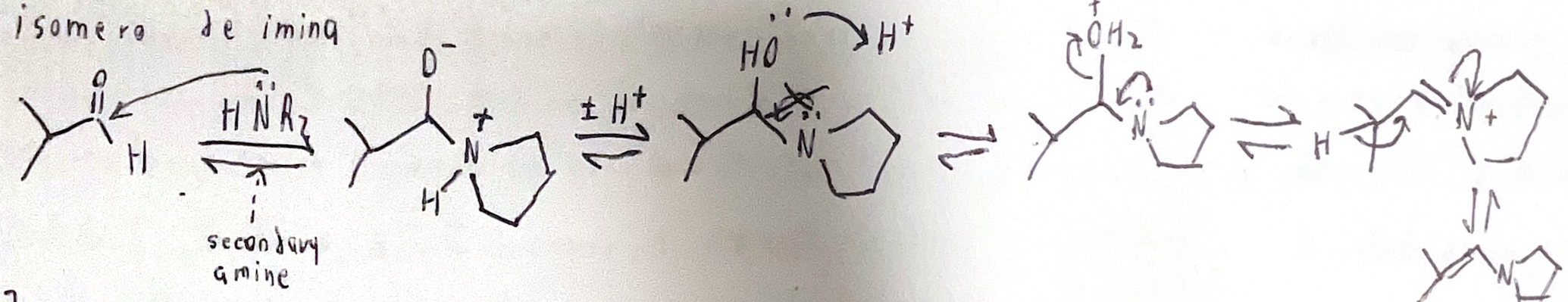


Se realiza una hidrolisis



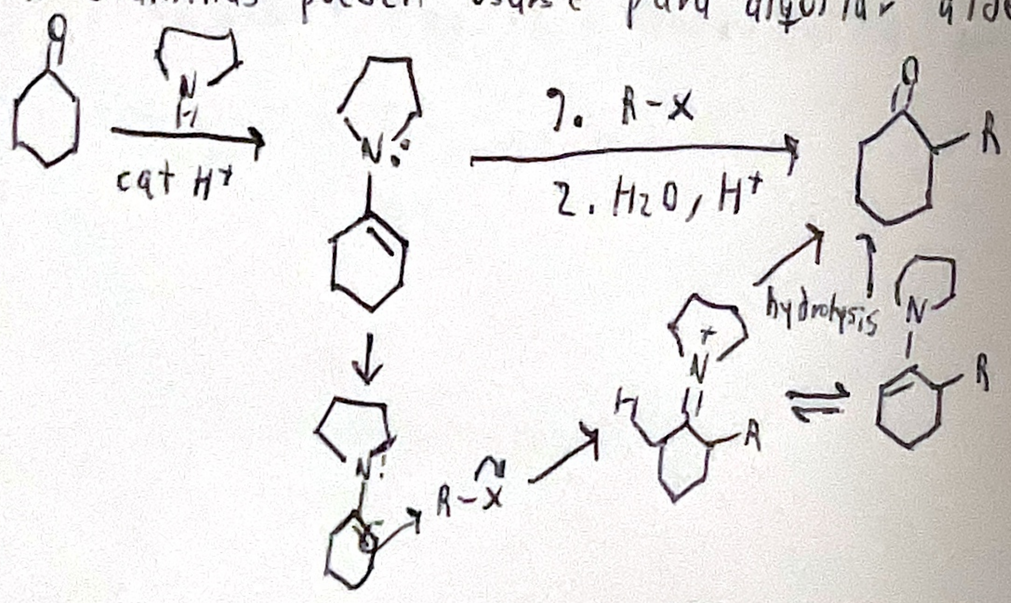
6. **Investigue como se sintetiza la *enamina de Stork* y su utilidad sintética. Ejemplifique con tres ejemplos el uso de la enamina de Stork en síntesis orgánica.**

Para la realización de esa síntesis es necesario de una amina secundaria y una cetona o aldehído, aunque también puede realizarse con una amina primaria pero solo en equilibrio con un isomero de imina

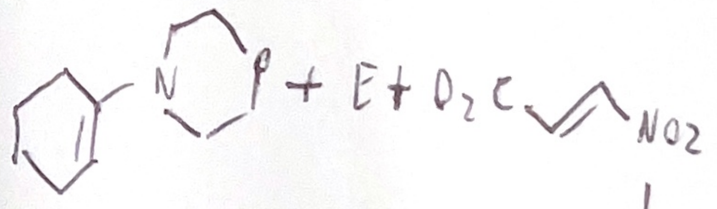


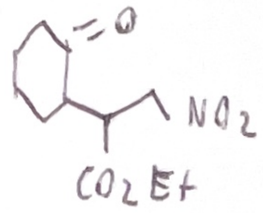
7.

Las enaminas pueden usarse para alquilar aldehídos y cetonas ; de esta manera.

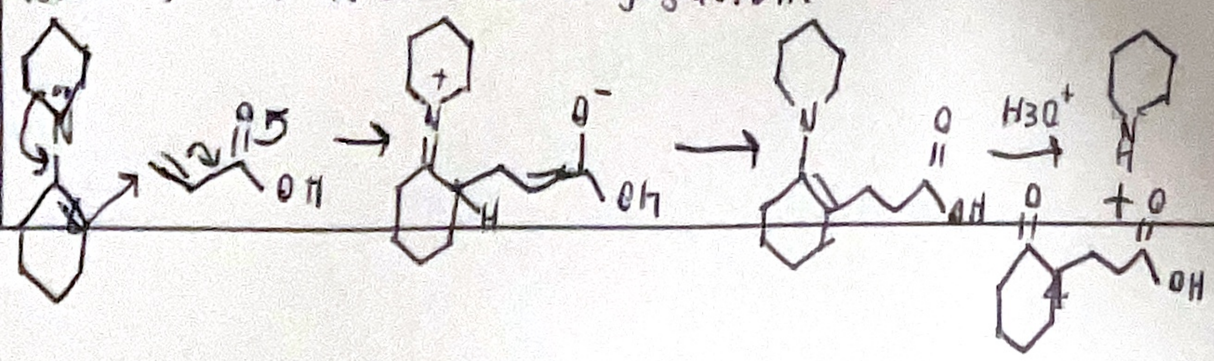


¡Sirven para alquilar cetonas no simetricas en el lado menos sustituido





2. En la síntesis de prostaglandina E_2, se forma un intermediario enolato y es importante, porque una enamina puede estabilizar el o los equivalentes de enol para ~~conjugar adiciones~~ una adición de conjugación.



7.	**Indique los usos de la dibenzalacetona** Debido a su capacidad de absorber la luz ultra violeta se usa en la formulación de protectores solares, actua en la síntesis de organometálicas de paladio, se comporta como catalizador homogeneo, también se usa en bases de maquillaje

Conclusiones

- La reacción de condensación aldólica cruzada se realiza entre compuestos carbonílicos con α-hidrógenos
- Solo un reactivo forma el enolato y el otro o el mismo, será mas reactivo,
- En la reacción de Claisen-Schmidt, se usa con bases como el NaOH, cuando un reactivo carece de α-hidrogenos
- Se obtuvo un rendimiento del 70.64%
- En la cromatoplaca se observa la diferencia de polaridad entre el reactivo y producto obtenido, siendo un resultado coherente.

Referencias

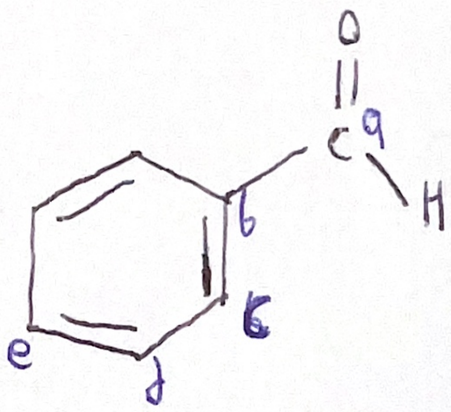
- Garduño Castro, Monserrat Hereniq. (2012). "Síntesis y aplicación de auxiliares quirales acíclicas" (Tesis de licenciatura). UNAM, México. Recuperado de https://repositorio.unam.mx/contenidos/200567
- McMurry, J. Química Orgánica 8a edición / Cengage Learning, México, 2012, pág. 607-617/652, 916
- Clayden, J., Greeves, N., & Warren, S. (2012). Organic Chemistry (2ªed.) Oxford University Press
- Prezi, A. G. M. O. (s. f.). Reacción de Gatermann-Koch. prezi.com. https://prezi.com
- Chemcess. (2024, 4 agosto). Benzaldehído: producción, reacciones y usos. https://chemcess.com

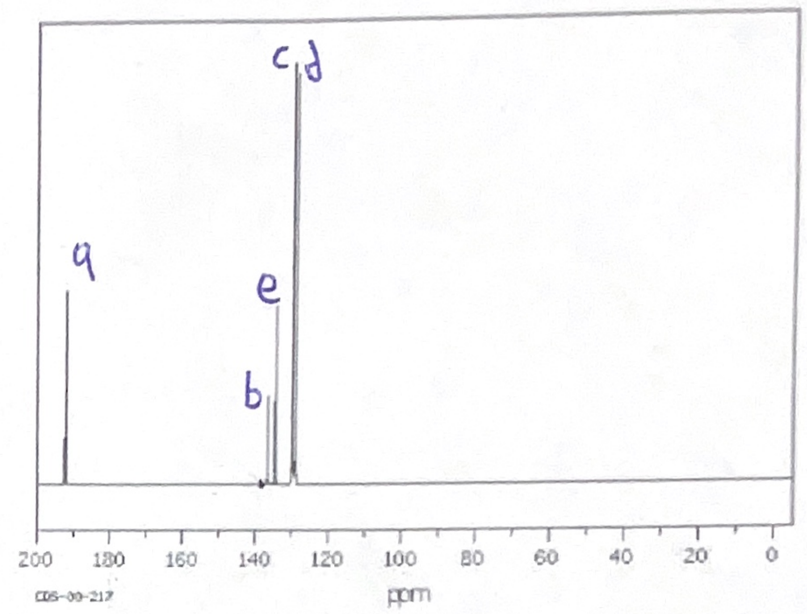
Elaboró: M. en C. Aldo Arellano Hernández

Química Orgánica II (1411). Laboratorio.
Práctica 8: Condensación de Claisen-Schmidt.
Resonancia Magnetica Nuclear ^{13}C (RMN-^{13}C)

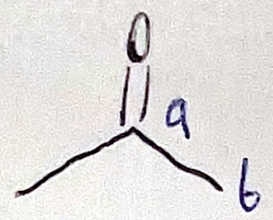
Instrucciones: En los espectros dibuje la estructura química del compuesto señalado. Numere posiciones de la estructura e indique a quien corresponde en el espectro.

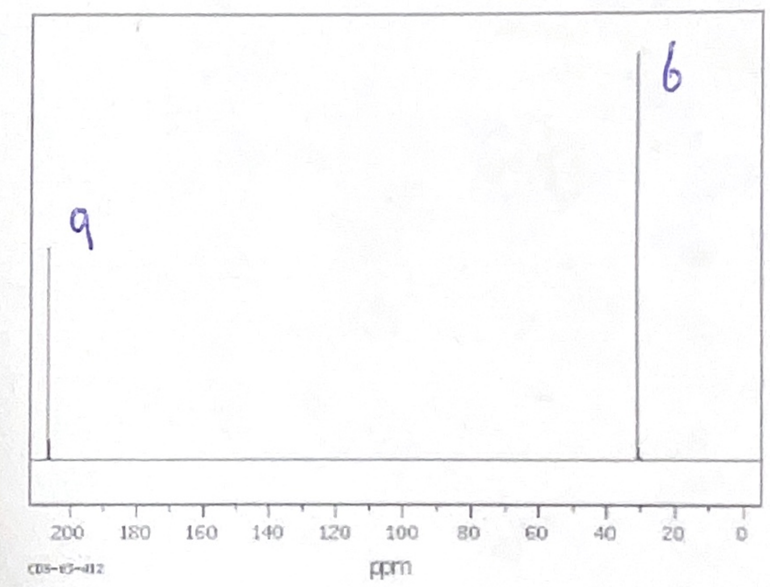
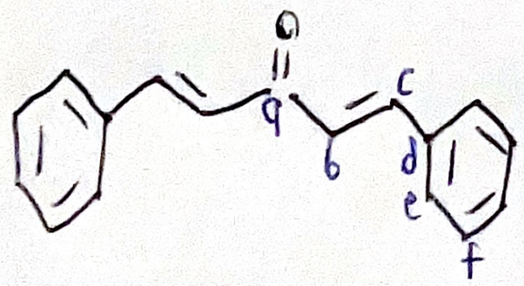
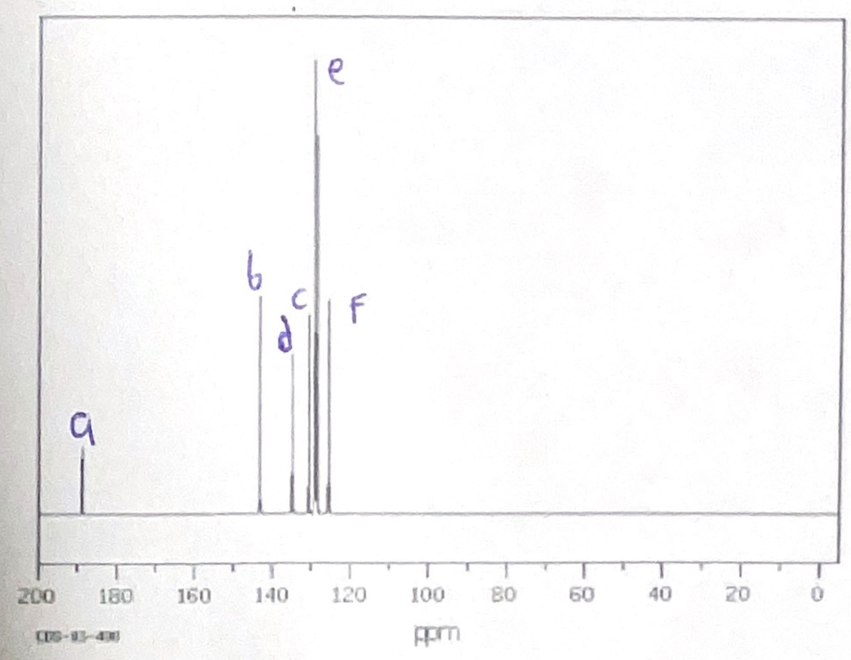
Benzaldehido





Acetona





Dibenzalacetona